

В процессе моделирования рассчитывались следующие характеристики цепи: компоненты тензора инерции, квадрат радиуса инерции, квадрат расстояния между концами цепи и спэны. Приложенная к концевым атомам сила является параметром расчета. Растяжения макромолекулы в состоянии рыхлого клубка подчиняется гуковскому закону и связано с потерей энтропии при растяжении. Анализ результатов моделирования показал, что можно выделить несколько режимов растяжения цепи, в зависимости от величины приложенной силы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 04-03-32185).

ВЛИЯНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗВЕНЬЕВ ГЕТЕРОЦЕПНОГО ПОЛИМЕРА НА УСЛОВИЯ ПЕРЕХОДА КЛУБОК - ГЛОБУЛА

Явина И.В., Никитина М.Е., Павлов А.С.

Тверской государственный университет

Целью данной работы было изучение влияния статистики распределения звеньев в двухбуквенном гетероцепном полимере на особенности перехода клубок – глобула. Несмотря на значительные успехи, достигнутые в исследовании перехода клубок – глобула, в ранних работах имеются и серьезные недостатки. Прежде всего, это короткие цепи, исследуемые методами имитационного моделирования, при этом в образующейся глобуле практически все звенья являются поверхностными. Кроме того обычно исследуется переход *клубок – рыхлая глобула*, т.е. система находится вблизи от θ - точки, хотя и ниже ее, а обычно используемая при этом система потенциалов, когда взаимодействие звеньев одного типа (сорт *A*) носит характер сильного притяжения, а другой тип атомов (сорт *B*) – стерическое отталкивание, перекрестное взаимодействие *A – B* носит, обычно, также характер стерического отталкивания.

В представленной работе расчеты проводились для молекул длиной $N = 1024$ мономерных звеньев. Моделировалась отдельная цепочка без периодических граничных условий. Использовалась модель свободно-сочлененной цепи с объемными эффектами, состоящая из разнородных звеньев сортов *A* и *B*, распределенных регулярно вдоль цепи. Длины блоков разнородных мономеров одинаковы и варьировались от 1 до 512 (выбиралась из ряда 2^n).

Особенностью модели используемой в работе является, то что, оба типа блоков в гетерополимере являются гидрофобными. Дальние взаимодействия описывались потенциалом Леннарда-Джонса $U(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$. Значение энергетического параметра ε для взаимодействий типа *A – A*, было выбрано равным 1,0, для взаимо-

действий $B - B$ $\epsilon_{BB} = 0.3$, а перекрестное взаимодействие $\epsilon_{AB} = 0.65$. Приведенная температура в системе варьировалась от 0.1 до 5.0.

Для сравнения были определены условия перехода клубок – глобула в гомополимере со значением энергетического параметра $\epsilon = 1.0$; $\epsilon = 0.65$ и $\epsilon = 0.30$. В процессе моделирования рассчитывались геометрические характеристики цепи $\langle S^2 \rangle$, $\langle R^2 \rangle$, компоненты тензора инерции полимерной молекулы, а также спэны. Кроме того, рассчитывались внутримолекулярный структурный фактор (форм-фактор) и функция радиального распределения плотности относительно центра инерции макромолекулы.

КОЛЛАПС ОДИНОЧНОЙ ЦЕПИ РЕГУЛЯРНОГО СОПОЛИМЕРА С РАЗЛИЧНОЙ ЖЕСТКОСТЬЮ БЛОКОВ

Нератова И.В., Темникова С.А.

Тверской государственный университет

Методом броуновской динамики выполнено моделирование процесса формирования глобулярного состояния одиночной цепи регулярного сополимера при постоянной температуре $T=1,0$. Цепь представлена чередующимися сегментами двух видов жесткости (жесткими (**A**) и гибкими (**B**)) одинаковой длины с различным сродством к растворителю. В предложенной модели длина звеньев сорта *A* и *B* варьировалась в пределах от 9 до 30. Общая длина цепи *N* также принимала различные значения.

Расчеты проводились как для случая плохого растворителя для жестких фрагментов цепи и хорошего для гибких, так и для случая плохого растворителя для гибких фрагментов. Качество растворителя моделировалось изменением энергии взаимодействия между отдельными звеньями полимерной цепи. Растворитель характеризуется вязкостью среды $\eta=0,5$.

Невалентные взаимодействия мономерных звеньев описывались потенциалом Леннарда-Джонса с радиусом обрезки $4,5\sigma$. Полная потенциальная энергия системы определялась как сумма всех видов энергий взаимодействия между силовыми центрами цепи.

Начальные конфигурации цепи генерировались методом случайных блужданий без самопересечений на кубической решетке и уравнивались в течение $\sim 3 \cdot 10^6$ шагов интегрирования. Во время режима релаксации условие хорошего растворителя выполнялось для всех силовых центров цепи. Переход в равновесное состояние определялся по стабилизации потенциальной энергии системы и отсутствию дрейфа размеров макромолекулы на достаточно больших временных интервалах. Для ка-